D. Zimmerling

Frankfurt a/Main 1970

[illegible]

I N A U G U R A L - D I S S E R T A T I O N

zur

ERLANGUNG DES DOKTORGRADES

der

[illegible] FAKULTÄT

der

JOHANN - WOLFGANG - GOETHE - UNIVERSITÄT

zu

FRANKFURT AM MAIN

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

EXISTENZ EINES BINDUNGSZUSTANDES BEIM KONDO-EFFEKT

I N A U G U R A L - D I S S E R T A T I O N

ZUR

ERLANGUNG DES DOKTORGRADES

DER

NATURWISSENSCHAFTLICHEN FAKULTÄT

DER

JOHANN - WOLFGANG - GOETHE - UNIVERSITÄT

ZU

FRANKFURT AM MAIN

VORGELEGT VON

DANKWART ZIMMERLING

AUS

VATTERODE (BEI MANSFELD)

MÄRZ 1970

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Frankfurt/Main

Dekan: Professor Dr. G. Schneider
Erster Berichterstatter: Professor Dr. P. Fulde
Zweiter Berichterstatter: Professor Dr. W. Greiner

Tag der mündlichen Prüfung: 22. April 1970

Inhaltsverzeichnis

Existenz eines Bindungszustandes beim Kondo-Effekt

1. ABGRENZUNG DES PROBLEMS

Löst man Atome der Übergangsmetalle oder Seltenen Erden in einem nichtmagnetischen Metall, so findet man häufig, daß die Verunreinigung ein von den Valenzelektronen ihrer 3d- bzw. 4f-Schale herrührendes lokalisiertes magnetisches Moment besitzt. Außerdem findet man bei diesen Legierungen in vielen Fällen eine Reihe von Anomalien in den elektronischen Eigenschaften, insbesondere in der Temperaturabhängigkeit des Widerstandes und der Thermokraft[1,2].

Das theoretische Interesse richtete sich zunächst auf die prinzipielle Frage, unter welchen Bedingungen sich in einem Metall ein magnetisches Moment bildet; dieses Problem wurde von Friedel[3] und Anderson[4] untersucht.

Setzt man die Existenz eines lokalisierten Moments voraus, dann läßt sich der die Wechselwirkung zwischen einer Verunreinigung und den Leitungselektronen beschreibende Hamiltonoperator durch

$$H = H_0 - \frac{J}{N} \sum_{p p' \alpha \alpha'} \psi^{+}_{p\alpha} \sigma^{i}_{\alpha\alpha'} \psi_{p'\alpha'} \hat{S}^{i} \qquad (1)$$

ausdrücken (s-d-Austausch-Modell). Dabei bedeuten $\sigma^{i}_{\alpha\alpha'}$ die Matrixelemente der Paulischen Spin-Matrizen; $\hat{S}^{i}$ sind die Komponenten (i=x,y oder z) des Spinoperators der Verunreinigung. J ist das Austauschintegral zwischen den s-Elektronen und dem lokalisierten Spin, und N die Zahl der Atome des Wirtsmetalls pro Volumeneinheit. Positives bzw. negatives J bedeutet ferro- bzw. antiferromagnetische Kopplung. Die $\psi^{+}_{p\alpha}$ und $\psi_{p\alpha}$ erzeugen und vernichten ein Leitungselektron mit dem Impuls $\vec{p}$ und dem Spin α; sie genügen den Fermivertauschungsrelationen.

In dieser Arbeit interessiert nur der Grenzfall sehr verdünnter Legierungen. So ist beim Hamiltonoperator die Beschränkung auf eine Verunreinigung zulässig; bei der Berechnung extensiver Eigenschaften des Systems muß dann jeweils mit der Verunreinigungskonzentration multipliziert werden.

Ausgelöst wurde letztere Betrachtungsweise durch Kondo[5], der zeigen konnte, daß mit (1) der Streuquerschnitt der Leitungselektronen an der Fermikante in Störungstheorie dritter Ordnung logarithmisch divergiert, wenn die Temperatur gegen Null geht. Die Analyse des Versagens der Störungstheorie führt zu dem Schluß, daß letzlich der zusätzliche innere Freiheitsgrad in der Verunreinigung und das für die Leitungselektronen geltende Pauliprinzip die physikalisch grundlegenden Fakten sind. Dieses von Kondo aufgedeckte Versagen machte es notwendig über die gewöhnliche Störungstheorie hinaus zu gehen; dabei wurden im wesentlichen drei verschiedene Wege verfolgt: Abrikosov's [6,7] Partialsummation von Diagrammen, die Dispersionstheorie von Suhl [8], und die Bewegungsgleichungs-Methode von Nagaoka [9,10].

Einen Schritt weiter zum tieferen Verständnis des Kondo-Problems bedeutet die Untersuchung der seit einer Arbeit von Nagaoka [11], in der er im Rahmen einer Näherungslösung die Polarisation der Leitungselektronen in der Nähe der Verunreinigung durch einen Bindungszustand beschreibt, immer wieder aufgeworfenen Frage, ob es unterhalb der Kondo-Temperatur T_K zur Bildung eines Bindungszustandes zwischen der Verunreinigung und den Leitungselektronen kommt. In der Supraleitungstheorie[12] - hier handelt es sich wie beim Kondoproblem um ein echtes Mehrteilchenproblem - wird die bekannte Singularität im Streuquer-

schnitt für sich in einem Metall gegenseitig streuende Elektronen (zwischen ihnen muß ein anziehendes Potential wirken) als erster Hinweis für die Instabilität des Streuzustandes gewertet; sie deutet den Phasenübergang vom normalen in den supraleitenden Zustand an und dient als Motivierung für die Einführung von anomalen Greensfunktionen.

Entsprechend einfach ist die Situation beim Kondo-Effekt nicht. Bei der Aufstellung der Suhl'schen Gleichung - wie es etwa in der Arbeit von Brenig und Götze[13] geschieht - sind in jeder Ordnung Störungstheorie nur die Diagramme mitgenommen worden, die am stärksten singulär sind, d.h. es ist mit sogenannter logarithmischer Genauigkeit aufsummiert worden. Der Suhl'schen Gleichung, eine Integralgleichung für die T-Matrix, ist zu entnehmen, daß T(z) auf der reellen Energieachse einen Schnitt hat, während auf den physikalischen Blättern in Übereinstimmung mit den Analytizitätsforderungen an eine T-Matrix keine Pole auftreten. Für eine spezielle Zustandsdichte[13] kann diese Integralgleichung auf zwei Quadraturen und eine transzendente Gleichung reduziert werden. Die Untersuchung der Eindeutigkeit der Lösung in der zitierten Arbeit führt zu dem Schluß, daß nur für antiferromagnetische Kopplung ein drastisches Verhalten von T erwartet werden kann. Sieht man sich daraufhin die Lösung in diesem Fall ($J < 0$) an, - sie kann für die Energie $z=0$ bei der Zerlegung (die wegen der Rotationssymmetrie des Hamiltonoperators möglich ist)

$$T(z) = t(z) + \tau(z)\, \vec{\sigma} \cdot \vec{S}$$

explizit angegeben werden:

$$\tau(z=0) = [\pi^2 S(S+1) + \ln^2(T/T_K)]^{-\frac{1}{2}}$$

$$t(z=\pm i0) = \pm\frac{i}{2\pi}\left\{\ln(T/T_K)\cdot[\pi^2 S(S+1) + \ln^2(T/T_K)]^{-\frac{1}{2}} - 1\right\}$$

(T_K ist hier nur ein Skalenfaktor, der durch die Wechselwirkung bestimmt wird: $T_K = T_o e^{-1/(2\alpha|J|/N)}$, $T_o \approx \epsilon_F$ = Fermienergie, α =Zustandsdichte an der Fermikante) -, so ist zu erkennen, daß beide Anteile zwar bei $T=T_K$ ein Maximum haben, jedoch keine Singularitäten zeigen. Entwickelt man den angegebenen Ausdruck für τ nach Potenzen von J (dasselbe kann man natürlich auch mit t machen), so treten auch weniger singuläre Terme auf. Berücksichtigt man jetzt in jeder Ordnung von J nur die am stärksten divergenten Beiträge, das sind in n. Ordnung Terme der Gestalt $|J|^n \ln^{n-1}(T/T_o)$, so bleibt genau die geometrische Reihe übrig, die man formal zu

$$\tau(0) = \frac{2\alpha|J|/N}{1 + 2\alpha|J|/N\cdot\ln(T/T_o)}$$

aufsummieren kann. Dieser Ausdruck wird für $T=T_K$ singulär - und zwar für beliebigen Spin S. Gegen diese singuläre Lösung ist einzuwenden, daß sie die Unitaritätsbedingung verletzt, die hingegen von der regulären Lösung erfüllt wird. Sieht man davon jedoch einmal ab, so ist die Tatsache, daß zwar die am meisten singulären Terme jeder Ordnung in der unitären Lösung enthalten sind, die weniger singulären Terme dagegen nicht vollständig,

ein Grund dafür, die Möglichkeit eines gebundenen Zustandes zu untersuchen.Ein weiterer Grund besteht darin, daß bei der Konstruktion einer regulären Lösung der Suhl´schen Gleichung mögliche singuläre Lösungen - und damit die Existenz von Bindungszuständen - ausgeschlossen wird. Ähnliches kann von den Nagaoka-Gleichungen nicht so leicht gesagt werden, da die hierbei vorgenommene Entkopplung der höheren Greensfunktion ziemlich willkürlich ist und alleine dazu dient, ein geschlossenes System von Gleichungen zu erhalten; allerdings gibt die von Zittartz[14] und Kawamura[15] aufgezeigte Äquivalenz zwischen Suhl und Nagaoka Grund zu der Annahme,daß hier implizit die gleichen Voraussetzungen eingegangen sind.

Das alles verdeutlicht, daß man von der Methode Suhl oder Nagaoka keinen Aufschluß über die Frage nach einem Bindungszustand erwarten darf. Es ist deshalb sinnvoll den dazu konträren Standpunkt einzunehmen; er geht davon aus, daß sich zwischen dem loklisierten Spin und den Leitungselektronen Bindungszustände bilden können, die durch anomale Amplituden beschrieben werden.

Das ist der Ausgangspunkt einer Arbeit von Takano und Ogawa[16], in der allerdings nicht alle anomalen F-Funktionen mitgenommen werden. Dies wird von Abrikosov[17] verbessert; jedoch werden die anomalen Greensfunktionen bei ihm auch nicht sorgfältiger behandelt als bei Takano und Ogawa, was weiter unten noch näher erläutert werden soll.

Im nächsten Kapitel wird für den Fall, daß der Spin der Verunreinigung S=1 (worauf sich die vorliegende Arbeit im folgenden beschränken wird), eine auf diesen speziellen Fall zuge-

schnittene, von Abrikosov[17] stammende Pseudofermionen-Methode kurz rekapituliert. Anschließend werden zur Berechnung der Greenschen Funktion der Leitungselektronen Bewegungsgleichungen aufgestellt, wobei die dabei auftretende Hierachie von Greensfunktionen durch Faktorisierung der Mehrteilchenfunktionen entkoppelt wird. Entsprechend einem Einwand von Nakajima[19] wird beachtet, daß die dabei auftretenden anomalen Greensfunktionen (z.B. $\langle T(\psi(\tau)\, a(\tau')) \rangle$) und dementsprechend die Amplituden nicht nur von der (imaginären) Zeitdifferenz $\tau - \tau'$, sondern außerdem von der Zeit τ' (oder τ) abhängen; und zwar über einen Faktor $e^{\lambda \tau'}$, wobei λ die Bindungsenergie der Verunreinigung mit den Elektronen bedeutet. Danach werden Konsistenzgleichungen für die zu den vier F-Funktionen korrespondierenden Amplituden aufgestellt; sie enthalten den Parameter λ , für den eine zusätzliche Bedingung gefunden werden muß. Das Nichtverschwinden der Amplituden impliziert die Existenz eines Bindungszustandes, die damit verbundene Energieabsenkung wird in selbstkonsistenter Weise errechnet.

Die Boltzmann-Konstante k_B sowie das Planck´sche Wirkungsquantum $\hbar$ werden in der ganzen Arbeit - durch geeignete Wahl der Einheiten - gleich eins gesetzt.

2. PSEUDO-FERMIONEN-METHODE für S = 1

Will man die Terme der Störungsreihe der thermodynamischen Greensfunktionen mit Hilfe des Wick'schen Theorems faktorisieren, so ist dies möglich, solange nur Bose- und Fermi-Operatoren vorkommen. Das Problem bei der Behandlung von Spinoperatoren besteht darin, daß es für Produkte von Spinoperatoren keine vergleichbar einfachen wie wirkungsvollen Faktorisierungs-Regeln gibt; allerdings existieren schon einige Versuche in dieser Richtung (vgl. Ref.[20,21,22]). Das liegt daran, daß die Spins nicht den Vertauschungsrelationen der Fermionen oder Bosonen, sondern denen für Drehimpulse

$$[\hat{S}^i, \hat{S}^j]_- = i\,\epsilon_{ijk}\,\hat{S}^k \tag{2}$$

gehorchen. Diese Schwierigkeit hat Abrikosov[6,17,18] dadurch bewältigt, daß er den lokalisierten Spin der Verunreinigung durch eine bilineare Form von Vernichtungs- und Erzeugungs-operatoren

$$\hat{S}^i = a^+_\beta\, a_{\beta'}\, \langle\beta|\,\hat{S}^i\,|\beta'\rangle \qquad (i = x, y, z) \tag{3}$$

dargestellt hat, wobei für die Spinmatritzen

$$\langle\beta|\,\hat{S}^z|\beta'\rangle = \beta'\cdot\delta_{\beta\beta'} \qquad \langle\beta|\,\hat{S}^\pm|\beta'\rangle = \delta_{\beta,\beta'\pm 1}\,\left[\,(S\mp\beta')\cdot(S\pm\beta'+1)\right]^{\frac{1}{2}}$$

gilt. Die a^+,a sind die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für ein Pseudoteilchen-Feld, die grundsätzlich als Bosonen oder Fermionen behandelt werden können. Denn es kommt nur darauf an, daß für die $\hat{S}^i$ die richtigen Vertauschungsrelationen (2) herauskommen. Für das folgende sollen sie der Fermistatistik

$$[a_\beta, a^+_{\beta'}]_+ = \delta_{\beta\beta'} \qquad [a_\beta, a_{\beta'}]_+ = 0$$

genügen. Die Drehimpulsvertauschungsrelationen (2) sind damit erfüllt, wie man leicht nachrechnen kann.

Jetzt könnte man die in der Feldtheorie übliche diagrammatische Entwicklung machen, wenn nicht mit Einführung dieser a und a^+ unphysikalische Zustände auftreten würden;das soll heißen: Charakterisiert man den Spin-Zustand durch die Besetzungszahlen der Pseudo-Teilchen, dann ist der allgemeine Zustand im Besetzungszahl-Raum

$$| n_S, n_{S-1}, \cdots, n_{-S} \rangle ,$$

wobei die n´s nur die Werte 0 oder 1 annehmen können. Somit gibt es genau $2^{(2S+1)}$ orthogonale Basis-Zustände. Physikalisch sinnvoll sind jedoch nur die (2S+1) Zustände, die einfach besetzt sind; das sind die (2S+1) Permutationen von $|1,0,\cdots,0\rangle$.
Es kommt also darauf an, einen Mechanismus zu finden, der diese unphysikalischen Zustände eliminiert.
Abrikosov[6,7] gelang dies durch Einführung eines Ausfrierfaktors, - für beliebigen Spin S; weiter konnte er zeigen, daß man für S $\leqq$ 1 ohne diesen oft etwas umständlichen Faktor auskommt.
Da sich diese Arbeit auf die Behandlung des Falles S = 1 beschränkt, soll auf die hierbei auftretende Situation näher eingegangen werden:
Bei S = 1 treten folgende physikalische und unphysikalische Zustände auf:

$$|001\rangle = |p_{-1}\rangle \qquad |011\rangle = |u_{-1}\rangle \qquad |000\rangle$$

$$|010\rangle = |p_0\rangle \qquad |101\rangle = |u_0\rangle \qquad |111\rangle$$
$$|100\rangle = |p_1\rangle \qquad |110\rangle = |u_1\rangle .$$

Mit (3) bekommt man für die physikalischen Zustände:

$$\hat{S}^z|p_{-1}\rangle = -1\cdot|p_{-1}\rangle \qquad \hat{S}^+|p_{-1}\rangle = S^+_{0,-1}|p_0\rangle \qquad \hat{S}^-|p_{-1}\rangle = 0$$
$$\hat{S}^z|p_0\rangle = 0 \qquad \hat{S}^+|p_0\rangle = S^+_{1,0}|p_1\rangle \qquad \hat{S}^-|p_0\rangle = S^-_{-1,0}|p_{-1}\rangle$$
$$\hat{S}^z|p_1\rangle = 1\cdot|p_1\rangle \qquad \hat{S}^+|p_1\rangle = 0 \qquad \hat{S}^-|p_1\rangle = S^-_{0,1}|p_0\rangle$$

und für die unphysikalischen Zustände:

$$\hat{S}^z|u_{-1}\rangle = -1\cdot|u_{-1}\rangle \qquad \hat{S}^+|u_{-1}\rangle = S^+_{1,0}|u_0\rangle \qquad \hat{S}^-|u_{-1}\rangle = 0$$
$$\hat{S}^z|u_0\rangle = 0 \qquad \hat{S}^+|u_0\rangle = S^+_{0,-1}|u_1\rangle \qquad \hat{S}^-|u_0\rangle = S^-_{0,1}|u_{-1}\rangle$$
$$\hat{S}^z|u_1\rangle = 1\cdot|u_1\rangle \qquad \hat{S}^+|u_1\rangle = 0 \qquad \hat{S}^-|u_1\rangle = S^-_{-1,0}|u_0\rangle .$$

Außerdem gilt hier (S=1)

$$S^+_{1,0} = S^+_{0,-1} = S^-_{-1,0} = S^-_{0,1} = \sqrt{2} .$$

Das bedeutet, daß die Wirkung eines Produkts von Spinoperatoren auf die $|u_i\rangle$ die gleiche ist wie auf die $|p_i\rangle$, so daß man die $|u_i\rangle$ mit zu den physikalischen Zuständen rechnen darf. Als unphysikalisch sind jetzt noch die beiden Zustände $|000\rangle$ $|111\rangle$ zu bezeichnen; wenn man $\hat{S}^i$ auf sie wirken läßt, ergibt sich Null:

$$\hat{S}^i|000\rangle = 0 \qquad \hat{S}^i|111\rangle = 0 . \tag{4}$$

Um den thermodynamischen Erwartungswert eines Operators $\hat{O}$ zu berechnen, darf man die Spur nur über physikalische Zustände nehmen

$$\bar{\hat{O}} = \sum_i \langle p_i| e^{-H/T}\hat{O}|p_i\rangle / \sum_i \langle p_i| e^{-H/T}|p_i\rangle .$$

Da die $|u_i\rangle$ den $|p_i\rangle$ völlig äquivalent sind, kann man dafür auch schreiben

$$\bar{\hat{O}} = \frac{\sum \langle p_i | e^{-H/T} \hat{O} | p_i \rangle + \sum \langle u_i | e^{-H/T} \hat{O} | u_i \rangle}{\sum_i \langle p_i | e^{-H/T} | p_i \rangle + \sum_i \langle u_i | e^{-H/T} | u_i \rangle} ,$$

falls $\hat{O}$ ein Operator der Gestalt

$$\hat{O} = \hat{S}^i \hat{S}^k \cdot \ldots \cdot \hat{S}^j$$

ist. Weiter kann wegen (4) im Zähler die Spur über alle Zustände genommen werden, so daß man

$$\bar{\hat{O}} = Sp[e^{-H/T} \hat{O}] / Sp_{phys}[e^{-H/T}]$$

erhält. Dabei bedeutet Sp Spurbildung über alle acht Zustände und Sp_{phys} die über die sechs "physikalischen" $|p_i\rangle$ und $|u_i\rangle$. Im Nenner ist es dagegen nicht möglich zu einer Spur über alle Zustände überzugehen. Führt man den Normierungsfaktor

$$Q = Sp_{phys}[e^{-H/T}] / Sp[e^{-H/T}]$$

ein, so kann man für den Erwartungswert schreiben:

$$\bar{\hat{O}} = \frac{Sp[e^{-H/T} \hat{O}]}{Sp[e^{-H/T}]} \cdot \frac{1}{Q} . \tag{5}$$

Es ist zu erkennen, daß Q nicht von dem betrachteten Operator $\hat{O}$ abhängt. Jetzt kann man in der üblichen Weise vorgehen, indem man zunächst

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{Sp[e^{-H/T} \hat{O}]}{Sp[e^{-H/T}]}$$

berechnet und zwar mit Hilfe der gewöhnlichen Diagramm-Technik, denn in Zähler und Nenner steht die Spur über ein vollständiges System von Zuständen. Das Ergebnis ist dann durch Q zu dividieren, das sich wie folgt berechnen läßt:

Der einfachste und (bei Spurbildung) nicht verschwindende Spinoperator ist $\hat{S}^2$; für ihn gilt mit (3) und (4)

$$\langle \hat{S}^2 \rangle = \frac{Sp[e^{-H/T}\hat{S}^2]}{Sp[e^{-H/T}]} = \frac{Sp_{phys}[e^{-H/T}\hat{S}^2]}{Sp[e^{-H/T}]} = \frac{2 \cdot Sp_{phys}[e^{-H/T}]}{Sp[e^{-H/T}]}$$

Die rechte Seite ist aber $2 \cdot Q$, so daß sich

$$Q = \langle \hat{S}^2 \rangle / 2 \tag{6}$$

ergibt. Das bedeutet, daß auch Q mit der Diagramm-Methode bestimmt werden kann.

Mit Einführung des Pseudo-Fermionen Feldes und Eliminierung der mit diesem Formalismus zwangsläufig auftretenden unphysikalischen Beiträgen ist es gelungen, das Problem der Faktorisierung von Erwartungswerten von Produkten aus Spinoperatoren auf das für Fermionen (Wick's Theorem) und damit auf die bekannte Diagramm-Technik zurückzuführen.

Allerdings sei nochmals betont, daß bei obigen Überlegungen wesentlich die Tatsache eingeht, daß bei einem aus den a^+_β und $a_{\beta'}$ gebildeten Operator die Koeffizienten gerade die Matrixelemente $S^i_{\beta\beta'}$ sind.

Mit (3) kann das Quadrat des Spinoperators (für S = 1) zu

$$\hat{S}^2 = 3\, a^+_\beta a_\beta - a^+_\beta a_\beta a^+_{\beta'} a_{\beta'} \tag{7}$$

umgeformt werden; damit kann später Q berechnet werden.

3. SYSTEM DER GLEICHUNGEN FÜR DIE GREENSFUNKTIONEN G UND D^+

Den zu Beginn des ersten Kapitels definierten Hamilton-operator (1) kann man mit (3) in die Form

$$H = \sum_{p\alpha} \xi_p \psi^+_{p\alpha} \psi_{p\alpha} - \frac{J}{N} \sum_{pp'\alpha\alpha'} \psi^+_{p\alpha} a^+_\beta a_{\beta'} \psi_{p'\alpha'} \sigma^i_{\alpha\alpha'} S^i_{\beta\beta'} \tag{8}$$

bringen. Die Energie $\xi_p = \frac{p^2}{2m} - \mu$ des freien Elektrons wird relativ zum chemischen Potential gemessen.

Der in demselben Kapitel dargelegte Standpunkt legt die Einführung folgender F-Funktionen[17)] nahe:

$$\left.\begin{aligned}
F^{(1)}_{k\alpha\beta}(\tau,\tau') &= \langle T_\tau(\psi_{k\alpha}(\tau)\ a_\beta(\tau'))\rangle \\
F^{(2)}_{k\alpha\beta}(\tau,\tau') &= \langle T_\tau(\psi^+_{k\alpha}(\tau)\ a^+_\beta(\tau'))\rangle \\
F^{(3)}_{k\alpha\beta}(\tau,\tau') &= \langle T_\tau(\psi_{k\alpha}(\tau)\ a^+_\beta(\tau'))\rangle \\
F^{(4)}_{k\alpha\beta}(\tau,\tau') &= \langle T_\tau(\psi^+_{k\alpha}(\tau)\ a_\beta(\tau'))\rangle .
\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

Die Klammern bedeuten den gewöhnlichen thermodynamischen Erwartungswert und T_τ den Zeitordnungsoperator; die Zeiten τ und τ' variieren in dem Bereich

$$0 \le \tau, \tau' \le 1/T \qquad (\ T = \text{Temperatur}\ ) .$$

Von diesen Funktionen abgeleitet werden die Amplituden:

$$\left.\begin{aligned}
\Delta^{(1)}_{\alpha\beta}(\tau,\tau) &= \frac{J}{N} \sigma^i_{\alpha\alpha_1} S^i_{\beta\beta_1} F^{(1)}_{\alpha_1\beta_1}(\tau,\tau) \\
\Delta^{(2)}_{\alpha\beta}(\tau,\tau) &= \frac{J}{N} \sigma^i_{\alpha_1\alpha} S^i_{\beta_1\beta} F^{(2)}_{\alpha_1\beta_1}(\tau,\tau)
\end{aligned}\right\} \tag{10}$$

$$\left.\begin{aligned}\Delta^{(3)}_{a\beta}(\tau,\tau) &= \frac{J}{N}\,\sigma^{i}_{aa_1}\,S^{i}_{\beta_1\beta}\,F^{(3)}_{a_1\beta_1}(\tau,\tau)\\ \Delta^{(4)}_{a\beta}(\tau,\tau) &= \frac{J}{N}\,\sigma^{i}_{a_1a}\,S^{i}_{\beta\beta_1}\,F^{(4)}_{a_1\beta_1}(\tau,\tau)\,,\end{aligned}\right\} \qquad (10)$$

wobei abkürzend gesetzt wurde

$$\sum_k F^{(i)}_{ka\beta}(\tau,\tau) = F^{(i)}_{a\beta}(\tau,\tau)\,.$$

Das Nichtverschwinden dieser $\Delta^{(i)}$ impliziert die Existenz von Bindungszuständen. Neben der Elektron-Greensfunktion

$$G_{aa'}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau(\psi_a(\tau)\,\psi^{+}_{a'}(\tau'))\rangle \qquad (11)$$

werden für das folgende noch die Funktionen

$$\left.\begin{aligned}g_{\beta\beta'}(\tau,\tau') &= -\langle T_\tau(a_\beta(\tau)\;a^{+}_{\beta'}(\tau'))\rangle\\ D_{aa'}(\tau,\tau') &= -\langle T_\tau(\psi_a(\tau)\;\psi_{a'}(\tau'))\rangle\\ D^{+}_{aa'}(\tau,\tau') &= +\langle T_\tau(\psi^{+}_a(\tau)\;\psi^{+}_{a'}(\tau'))\rangle\\ \mathcal{J}_{\beta\beta'}(\tau,\tau') &= -\langle T_\tau(a_\beta(\tau)\;a_{\beta'}(\tau'))\rangle\\ \mathcal{J}^{+}_{\beta\beta'}(\tau,\tau') &= +\langle T_\tau(a^{+}_\beta(\tau)\;a^{+}_{\beta'}(\tau'))\rangle\end{aligned}\right\} \qquad (12)$$

gebraucht. Bei allen thermodynamischen Erwartungswerten ist die Spur über alle, d.h. über physikalische und unphysikalische Zustände zu nehmen.

Der Hamiltonoperator (8) führt für die Elektronen-Greensfunktion mit Hilfe von

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle T(A(\tau) B(\tau')) \rangle = \delta(\tau-\tau') \langle [A,B]_+ \rangle - \langle T([A(\tau), H(\tau)]_-, B(\tau')) \rangle$$

(A und B Fermioperatoren, alle Operatoren im Heisenberg-Bild) zu der Bewegungsgleichung

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} G_{\substack{kk' \\ \gamma\gamma'}}(\tau,\tau') = \delta(\tau-\tau') \cdot \delta_{\gamma\gamma'} - \varepsilon_k \cdot \langle T(\psi_{k\gamma}(\tau)\ \psi^+_{k'\gamma'}(\tau')) \rangle +$$

$$+ \frac{J}{N} \sigma^i_{\gamma\alpha'} S^i_{\beta\beta'} \sum_{p'} \langle T(\psi_{p'\alpha'}(\tau)\, a^+_\beta(\tau)\, a_{\beta'}(\tau)\ \psi^+_{k'\gamma'}(\tau')) \rangle.$$

Um G berechnen zu können, muß man zuvor die auf der rechten Seite auftretende Zweiteilchen-Greensfunktion kennen. Ähnlich wie in der Supraleitungstheorie macht man die Faktorisierung

$$\langle T(\psi_{\alpha'}(\tau)\, a^+_\beta(\tau)\, a_{\beta'}(\tau)\, \psi^+_{\gamma'}(\tau')) \rangle \simeq \langle T(\psi_{\alpha'}(\tau)\, \psi^+_{\gamma'}(\tau')) \rangle \langle a^+_\beta(\tau)\, a_{\beta'}(\tau) \rangle +$$

$$+ \langle \psi_{\alpha'}(\tau)\, a_{\beta'}(\tau) \rangle \langle T(\psi^+_{\gamma'}(\tau')\, a^+_\beta(\tau)) \rangle - \langle \psi_{\alpha}(\tau)\, a^+_\beta(\tau) \rangle \langle T(\psi^+_{\gamma'}(\tau')\, a_{\beta'}(\tau)) \rangle.$$

Das bedeutet, daß man alle Streueffekte von s-Elektronen an der Verunreinigung weggelassen hat; die Wechselwirkung ist nur insoweit berücksichtigt worden, wie sie zu Bindungszuständen führt. Der erste Term auf der rechten Seite fällt beim Einsetzen in die Bewegungs-Gleichung weg, denn wegen (3) gilt

$$\langle a^+_\beta\, a_{\beta'} \rangle\, S^i_{\beta\beta'} = \langle \hat{S}^i \rangle \;;$$

dieser Erwartungswert verschwindet aber, solange kein äußeres Feld angelegt wird, so daß man unter Berücksichtigung von (9) und

und (10)

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau}-\xi_k\right)G_{\substack{kk'\\ \gamma\gamma'}}(\tau,\tau')=\delta(\tau-\tau')\,\delta_{kk'}+\Delta^{(1)}_{\gamma\beta}(\tau,\tau)\,F^{(2)}_{k'\gamma'\beta}(\tau',\tau)-\Delta^{(3)}_{\gamma\beta}(\tau,\tau)\,F^{(4)}_{k'\gamma'\beta}(\tau',\tau)$$

bekommt; bzw. nach der Summation über den Impuls $\vec{k}'$:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau}-\xi_k\right)\sum_{k'}G_{\substack{kk'\\ \gamma\gamma'}}(\tau,\tau')=\delta(\tau-\tau')\,\delta_{\gamma\gamma'}+\Delta^{(1)}_{\gamma\beta}(\tau,\tau)\,\bar{F}^{(2)}_{\gamma'\beta}(\tau',\tau)-\Delta^{(3)}_{\gamma\beta}\,F^{(4)}_{\gamma'\beta}(\tau',\tau)$$

Man erhält ein geschlossenes System von Gleichungen, wenn man die analogen Rechnungen für die Funktionen D^{+}, $F^{(2)}$ und $F^{(4)}$ ausführt:

$$\left.\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\xi_k\right)\sum_{k'}D^{+}_{\substack{kk'\\ \gamma\gamma'}}(\tau,\tau') &= -\Delta^{(4)}_{\gamma\beta}(\tau,\tau)\,F^{(2)}_{\gamma'\beta}(\tau',\tau)+\Delta^{(2)}_{\gamma\beta}(\tau,\tau)\,F^{(4)}_{\gamma'\beta}(\tau',\tau)\\
\frac{\partial}{\partial\tau'}F^{(2)}_{q\beta}(\tau,\tau') &= \Delta^{(2)}_{q'\beta}(\tau',\tau')\,G_{q'q}(\tau',\tau)+\Delta^{(3)}_{q'\beta}(\tau',\tau')\,D^{+}_{q'q}(\tau',\tau)\\
\frac{\partial}{\partial\tau'}F^{(4)}_{q\beta}(\tau,\tau') &= -\Delta^{(4)}_{q'\beta}(\tau',\tau')\,G_{q'q}(\tau',\tau)-\Delta^{(1)}_{q'\beta}(\tau',\tau')\,D^{+}_{q'q}(\tau',\tau),
\end{aligned}\right\}\qquad(13)$$

wobei zur Abkürzung $\sum_{pk}G_{pk}=G$, $\sum_{pk}D^{+}_{pk}=D^{+}$ und $\sum_{k}F^{(i)}_{k}=F^{(i)}$ gesetzt worden ist; dies sind die Greensfunktionen am Ort der Verunreinigung.

Nakajima[19] hat darauf hingewiesen, daß die anomalen Greens=funktionen nicht nur von der Zeitdifferenz $\tau-\tau'$, sondern außer=dem von τ (oder τ') abhängen. Um diese Abhängigkeit zu erhalten, führt man mit

$$\lambda = \bar{H}_{J=0} - \bar{H}_J \qquad (14)$$

die Bindungsenergie λ ein; d.h. λ ist diejenige Energie=verschiebung, die das System durch die s-d-Austausch-Kopplung der Elektronen mit der Verunreinigung erfährt. Betrachtet man (analog wie in der Supraleitungstheorie[12]) den Erwartungswert

$\langle \cdots \rangle$, der genaugenommen die Spur über eine großkanonische Gesamtheit bedeutet, als quantenmechanischen Erwartungswert über einen repräsentativen Zustand mit einer mittleren Energie und einer mittleren Teilchenzahl, so folgt für die τ, τ' - Abhängigkeit der $F^{(i)}$-Funktionen und entsprechend der Amplituden $\Delta^{(i)}$ zu gleichen Zeiten:

$$\left.\begin{array}{ll} F^{(1)}(\tau,\tau') = e^{\lambda\tau'} F^{(1)}(\tau-\tau') & \Delta^{(1)}(\tau,\tau) = e^{\lambda\tau} \Delta^{(1)} \\ F^{(2)}(\tau,\tau') = e^{-\lambda\tau'} F^{(2)}(\tau-\tau') & \Delta^{(2)}(\tau,\tau) = e^{-\lambda\tau} \Delta^{(2)} \\ F^{(3)}(\tau,\tau') = e^{-\lambda\tau'} F^{(3)}(\tau-\tau') & \Delta^{(3)}(\tau,\tau) = e^{-\lambda\tau} \Delta^{(3)} \\ F^{(4)}(\tau,\tau') = e^{\lambda\tau'} F^{(4)}(\tau-\tau') & \Delta^{(4)}(\tau,\tau) = e^{\lambda\tau} \Delta^{(4)} . \end{array}\right\} \quad (15)$$

Unter Berücksichtigung dieser τ -Abhängigkeit bekommt man nach Ausführung der Fouriertransformation

$$A(\tau) = T\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau} A(\omega_n) , \qquad \omega_n = (2n+1)\pi T$$

für das System der vier Gleichungen:

$$\left.\begin{array}{l} (i\omega - \xi_k)\sum_{k'} G_{kk' \atop \gamma\gamma'}(\omega) = \delta_{\gamma\gamma'} + \Delta^{(1)}_{\gamma\beta} F^{(2)}_{\gamma'\beta}(-\omega) - \Delta^{(3)}_{\gamma\beta} F^{(4)}_{\gamma'\beta}(-\omega) \\ (-i\omega - \xi_k)\sum_{k'} D^{+}_{kk' \atop \gamma\gamma'}(\omega) = - \Delta^{(4)}_{\gamma\beta} F^{(2)}_{\gamma'\beta}(-\omega) + \Delta^{(2)}_{\gamma\beta} F^{(4)}_{\gamma'\beta}(-\omega) \\ (i\omega + \lambda) F^{(2)}_{\alpha\beta}(-\omega) = - \Delta^{(2)}_{\alpha'\beta} G_{\alpha'\alpha}(\omega) - \Delta^{(3)}_{\alpha'\beta} D^{+}_{\alpha'\alpha}(\omega) \\ (i\omega - \lambda) F^{(4)}_{\alpha\beta}(-\omega) = \Delta^{(4)}_{\alpha'\beta} G_{\alpha'\alpha}(\omega) + \Delta^{(1)}_{\alpha'\beta} D^{+}_{\alpha'\alpha}(\omega) . \end{array}\right\} \quad (16)$$

Setzt man jetzt $F^{(2)}$ und $F^{(4)}$ in die Gleichungen für G und D^{+} ein, so ergibt sich

$$\left.\begin{aligned}
G_{\gamma\gamma'}(\omega) &= -i\pi a\,\mathrm{sgn}\,\omega\,\delta_{\gamma\gamma'} + i\pi a\,\mathrm{sgn}\,\omega \sum_{\beta}\left[\frac{\Delta^{(1)}_{\gamma\beta}\cdot\Delta^{(2)}_{a\beta}}{i\omega+\lambda} + \frac{\Delta^{(3)}_{\gamma\beta}\cdot\Delta^{(4)}_{a\beta}}{i\omega-\lambda}\right] G_{a\gamma'}(\omega) + \\
&\quad + i\pi a\,\mathrm{sgn}\,\omega \sum_{\beta}\left[\frac{\Delta^{(1)}_{\gamma\beta}\cdot\Delta^{(3)}_{a\beta}}{i\omega+\lambda} + \frac{\Delta^{(3)}_{\gamma\beta}\cdot\Delta^{(1)}_{a\beta}}{i\omega-\lambda}\right] D^{+}_{a\gamma'}(\omega) \\
D^{+}_{\gamma\gamma'}(\omega) &= +i\pi a\,\mathrm{sgn}\,\omega \sum_{\beta}\left[\frac{\Delta^{(2)}\cdot\Delta^{(4)}}{i\omega-\lambda} + \frac{\Delta^{(4)}\cdot\Delta^{(2)}}{i\omega+\lambda}\right] G_{a\gamma'}(\omega) + \\
&\quad + i\pi a\,\mathrm{sgn}\,\omega \sum_{\beta}\left[\frac{\Delta^{(2)}_{\gamma\beta}\cdot\Delta^{(1)}_{a\beta}}{i\omega-\lambda} + \frac{\Delta^{(4)}_{\gamma\beta}\cdot\Delta^{(3)}_{a\beta}}{i\omega+\lambda}\right] D^{+}_{a\gamma'}(\omega)\,,
\end{aligned}\right\} \quad (17)$$

wobei die Summation über den Impuls $\vec{k}$ unter Verwendung von

$\sum_{k}\frac{1}{i\omega-\xi_k} = -i\pi a\,\mathrm{sgn}\,\omega\,,\quad a = \frac{p_F\cdot m}{2\pi^2}$ (= Zustandsdichte an d. Fermikante) bereits ausgeführt worden ist.

4. AUFSTELLUNG DER KONSISTENZ-GLEICHUNGEN

Aus der Definition (10) der Amplituden folgt unmittelbar:

$$\Delta^{(2)}_{q\beta} = -\Delta^{(1)*}_{q\beta}\ , \qquad \Delta^{(4)}_{q\beta} = -\Delta^{(3)*}_{q\beta}\ ;$$

weiter soll angenommen werden, daß die $\Delta^{(i)}_{q\beta}$ reell sind, also

$$\Delta^{(2)}_{q\beta} = -\Delta^{(1)}_{q\beta}\ , \qquad \Delta^{(4)}_{q\beta} = -\Delta^{(3)}_{q\beta}\ . \tag{18}$$

Definiert man

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{U}^{(1)}_{qq_1}(\omega) &= \sum_\beta \left[\Delta^{(2)}_{q\beta}\Delta^{(2)}_{q_1\beta}\frac{1}{i\omega+\lambda} + \Delta^{(4)}_{q\beta}\Delta^{(4)}_{q_1\beta}\frac{1}{i\omega-\lambda}\right] \\ \mathcal{U}^{(2)}_{qq_1}(\omega) &= \sum_\beta \left[-\Delta^{(2)}_{q\beta}\Delta^{(4)}_{q_1\beta}\frac{1}{i\omega+\lambda} - \Delta^{(4)}_{q\beta}\Delta^{(2)}_{q_1\beta}\frac{1}{i\omega-\lambda}\right], \end{aligned}\right\} \tag{19}$$

so läßt sich damit das zu lösende Gleichungssystem (17) schreiben:

$$\left.\begin{aligned} G_{qq'}(\omega) &= -i\pi q\,\mathrm{sgn}\,\omega \left[\delta_{qq'} + \mathcal{U}^{(1)}_{qq_1}(\omega)\,G_{q_1q'}(\omega) + \mathcal{U}^{(2)}_{qq_1}(\omega)\,D^{+}_{q_1q'}(\omega)\right] \\ D^{+}_{qq'}(\omega) &= \quad +i\pi q\,\mathrm{sgn}\,\omega \left[\mathcal{U}^{(2)}_{qq_1}(-\omega)\,G_{q_1q'}(\omega) + \mathcal{U}^{(1)}_{qq_1}(-\omega)\,D^{+}_{q_1q'}(\omega)\right]. \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

Abrikosov[17)] konnte zeigen, daß sich ein Bindungszustand, - wenn überhaupt - , nur dann bilden kann, falls der Gesamtspin $S - \frac{1}{2}$ beträgt, während ein Zustand mit $S + \frac{1}{2}$ mit Sicherheit auszuschließen ist. Es sind also nur solche Amplituden von Null verschieden, die einen Bindungszustand mit dem Gesamtspin $I = S - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ beschreiben. Demnach verschwinden:

$$\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}-1} = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau} \langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{-1}(\tau) \rangle \qquad \Delta^{(4)}_{-\frac{1}{2}1} = -\frac{3}{N} e^{\lambda\tau} \langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{1}(\tau) \rangle$$

$$\Delta^{(2)}_{\frac{1}{2}1} = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau} \langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{1}(\tau) \rangle \qquad \Delta^{(4)}_{\frac{1}{2}-1} = -\frac{3}{N} e^{\lambda\tau} \langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{-1}(\tau) \rangle$$

und übrig bleiben die folgenden acht Amplituden:

$$\left.\begin{aligned}
\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}0} &= \frac{3}{N}\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(2)}_{\frac{1}{2}-1}(\omega) && = \frac{3}{N}\sqrt{2}\, e^{\lambda\tau} \langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{-1}(\tau) \rangle \\
\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}1} &= \frac{3}{N}\Big[\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(2)}_{\frac{1}{2}0}(\omega) - T\sum_{\omega} F^{(2)}_{-\frac{1}{2}1}(\omega)\Big] && = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau}\Big[\sqrt{2}\langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{0}(\tau)\rangle - \langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{1}(\tau)\rangle\Big] \\
\Delta^{(2)}_{\frac{1}{2}-1} &= \frac{3}{N}\Big[\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(2)}_{-\frac{1}{2}0}(\omega) - T\sum_{\omega} F^{(2)}_{\frac{1}{2}-1}(\omega)\Big] && = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau}\Big[\sqrt{2}\langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{0}(\tau)\rangle - \langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{-1}(\tau)\rangle\Big] \\
\Delta^{(2)}_{\frac{1}{2}0} &= \frac{3}{N}\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(2)}_{-\frac{1}{2}1}(\omega) && = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau}\sqrt{2}\langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a^{+}_{1}(\tau)\rangle \\
\Delta^{(4)}_{-\frac{1}{2}-1} &= \frac{3}{N}\Big[T\sum_{\omega} F^{(4)}_{-\frac{1}{2}-1}(\omega) + \sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(4)}_{\frac{1}{2}0}(\omega)\Big] && = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau}\Big[\langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{-1}(\tau)\rangle + \sqrt{2}\langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{0}(\tau)\rangle\Big] \\
\Delta^{(4)}_{-\frac{1}{2}0} &= \frac{3}{N}\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(4)}_{\frac{1}{2}1}(\omega) && = \frac{3}{N}\sqrt{2}\, e^{\lambda\tau}\langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{1}(\tau)\rangle \\
\Delta^{(4)}_{\frac{1}{2}0} &= \frac{3}{N}\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(4)}_{-\frac{1}{2}-1}(\omega) && = \frac{3}{N}\sqrt{2}\, e^{\lambda\tau}\langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{-1}(\tau)\rangle \\
\Delta^{(4)}_{\frac{1}{2}1} &= \frac{3}{N}\Big[\sqrt{2}\,T\sum_{\omega} F^{(4)}_{-\frac{1}{2}0}(\omega) + T\sum_{\omega} F^{(4)}_{\frac{1}{2}1}(\omega)\Big] && = \frac{3}{N} e^{\lambda\tau}\Big[\sqrt{2}\langle \psi^{+}_{-\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{0}(\tau)\rangle + \langle \psi^{+}_{\frac{1}{2}}(\tau)\, a_{1}(\tau)\rangle\Big].
\end{aligned}\right\} \qquad (21)$$

Geht man davon aus, daß diese acht Amplituden nicht völlig unabhängig voneinander sind, so besteht die naheliegendste Annahme darin, alle einander gleich zu setzen; dies führt jedoch sofort zu wiedersprüchlichen Ergebnissen. Eine etwas schwächere Annahme[17)], deren Konsistenz weiter unten gezeigt wird, läßt zwei verschiedene Amplituden Δ_0 und Δ_1 zu:

$$\left.\begin{aligned} \Delta^{(4)}_{-\frac{1}{2}-1} &= -\Delta^{(4)}_{\frac{1}{2}1} = -\Delta^{(2)}_{\frac{1}{2}-1} = -\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}1} = \boldsymbol{\Delta}_1 \\ \Delta^{(4)}_{-\frac{1}{2}0} &= -\Delta^{(4)}_{\frac{1}{2}0} = -\Delta^{(2)}_{\frac{1}{2}0} = -\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}0} = \boldsymbol{\Delta}_0 . \end{aligned}\right\} \qquad (22)$$

Im Anhang A wird mit dieser Wahl der Amplituden das System (20) gelöst. Mit den so gewonnenen Greensfunktionen G und D^+ läßt sich die $F^{(2)}$ - Funktion (16) errechnen. Geht man damit in die Ausdrücke für $\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}0}$ und $\Delta^{(2)}_{-\frac{1}{2}1}$ (die beiden ersten Gleichungen von (21)) ein, so bekommt man unter Berücksichtigung von (22) das homogene Gleichungssystem:

$$\boldsymbol{\Delta}_0 = -\sqrt{2} \cdot I_{H_1+E_2} \cdot \boldsymbol{\Delta}_1$$

$$\boldsymbol{\Delta}_1 = \sqrt{2} \cdot \left(I_{H_2+E_1} - I_{H_1+E_2} \right) \cdot \boldsymbol{\Delta}_0 + I_{H_1+E_2} \cdot \boldsymbol{\Delta}_1 \quad ,$$

wobei

$$I_{H_i+E_k} = \frac{3}{N}\, T \sum_{\omega} \frac{1}{i\omega - \lambda} \left[H_i(\omega) + E_k(\omega) \right]$$

(die H_i und E_k können dem Anhang A entnommen werden). Die restlichen sechs Amplituden von (21) ergeben dieselben Beziehungen, womit erwiesen ist, daß die Annahme (22) widerspruchsfrei ist. Mit Hilfe von Formel (A4) kann man das Gleichungssystem noch weiter vereinfachen

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{\Delta}_0 - \sqrt{2}\,(I_1 + I_2) \cdot \boldsymbol{\Delta}_1 &= 0 \\ 2\sqrt{2}\, I_2 \cdot \boldsymbol{\Delta}_0 - (I_1 + I_2 + 1) \cdot \boldsymbol{\Delta}_1 &= 0 \; , \end{aligned}\right\} \qquad (23)$$

wobei die Koeffizienten durch

$$\left.\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2}\cdot\frac{\mathcal{J}}{N}\, T \sum_{\omega} \frac{a}{i\omega - \lambda + 2a\Delta_1^2} \qquad (a = +i\pi\alpha\, \mathrm{sgn}\,\omega) \\ I_2 &= \frac{1}{2}\cdot\frac{\mathcal{J}}{N}\, T \sum_{\omega} \frac{a}{i\omega - \lambda + 2a(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)} \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

gegeben sind. (23) hat nur dann eine von Null verschiedene Lösung, falls seine Determinante

$$\mathrm{Det} = -(I_1 + I_2 + 1) + 4 I_2 (I_1 + I_2)$$

verschwindet.

Aus (24) läßt sich unmittelbar die kritische Temperatur T_K bestimmen. Sie ist dadurch charakterisiert, daß bei ihr (und bei Temperaturen oberhalb T_K) $\Delta_o = \Delta_1 = 0$ und $\lambda = 0$. Damit ist $I_1 = I_2$; aus dem Verschwinden der Determinante folgt dann in dem hier zu untersuchenden Fall $J < 0$ die Lösung $I_1 = I_2 = -\frac{1}{4}$, so daß sich nach einigen Umformungen

$$1 = 4\pi\alpha \frac{|\mathcal{J}|}{N} T_K \sum_{\omega > 0} \frac{1}{\omega}$$

ergibt. Hierbei müssen die oberhalb der Fermieenergie ϵ_F liegenden Frequenzen ω abgeschnitten werden. Das rührt daher, daß die vorausgehende Energieintegration eigentlich nur bis ϵ_F gehen darf, da die zu betrachtenden Zustände im Leitungsband der Elektronen liegen sollen. Es kann jedoch gezeigt werden, daß man dafür auch die Frequenz - Summation beschränken kann, wie es hier geschehen ist. Auf die Weise erhält man den bekannten Zusammenhang zwischen Kondotemperatur und Kopplungskontante

$$T_K = \frac{2\gamma}{\pi} \epsilon_F \cdot \exp\left[-1/(2\alpha|\mathcal{J}|/N)\right], \quad \frac{2\gamma}{\pi} = 1.13 \tag{25}$$

Das ist die gleiche Temperatur, die in Kapitel 1. bereits als Skalenfaktor auftrat.

Mit der so ausgezeichneten Temperatur $T = T_k$ lassen sich die Konsistenz-Gleichungen neu formulieren:

Führt man das Verhältnis der Amplituden Δ_0 und Δ_1

$$\Delta_0 / \Delta_1 = x$$

als neue Größe ein, so folgt mit (23)

$$\left.\begin{aligned} I_1 &= -\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{2}}{4} \cdot \frac{1}{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot x \\ I_2 &= \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{2}}{4} \cdot \frac{1}{x} \quad . \end{aligned}\right\} \qquad (26)$$

Die Summen in (24) lassen sich durch die Ψ-Funktion, definiert als Ableitung des Logarithmus der Gamma-Funktion, ausdrücken. Mit

$$T \sum_{\omega > 0} \frac{1}{\omega + \Theta + i\lambda} \simeq -\frac{1}{2\pi} \left[\Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\Theta}{2\pi T} + \frac{i\lambda}{2\pi T}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] + \frac{1}{2\pi} \ln \frac{2\gamma \epsilon_F}{\pi \cdot T}$$

folgt unter Verwendung von (25) :

$$\left.\boxed{\begin{aligned} \mathrm{Re}\left[\Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\Theta + i\lambda}{2\pi T}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] &= \frac{1}{4} I_1 \cdot \ln \frac{2\gamma \epsilon_F}{\pi T_k} + \ln \frac{2\gamma \epsilon_F}{\pi T} \\ \mathrm{Re}\left[\Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\Theta \cdot (2x^2 + 1) + i\lambda}{2\pi T}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] &= \frac{1}{4} I_2 \cdot \ln \frac{2\gamma \epsilon_F}{\pi T_k} + \ln \frac{2\gamma \epsilon_F}{\pi T} \end{aligned}} \quad ; \right\} \qquad (27)$$

dabei bedeutet $\Theta = 2\pi \alpha \Delta_1^2$.

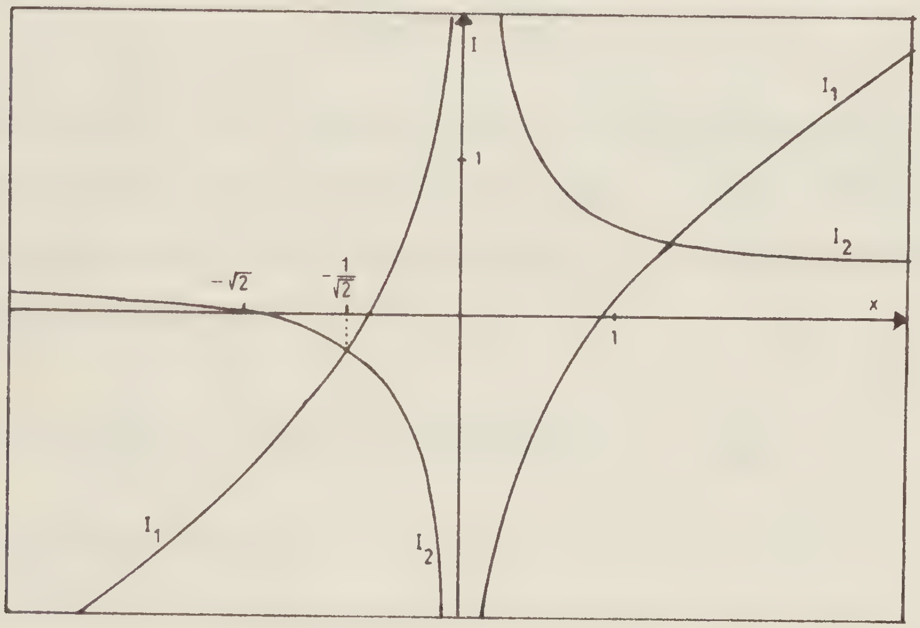
Man kann aus (24) entnehmen, daß (für $J < 0$) stets

$$I_1 < I_2 < 0$$

ist; das ist nur in dem Bereich

$$-\sqrt{2} \leq x \leq -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

möglich, was sofort aus der folgenden Skizze ersichtlich wird:



Durch Addition der beiden Gleichungen in (26) erhält man $x=\sqrt{2}\,(I_1 + I_2)$. Da für $T = T_K$: $I_1 = I_2 = -\frac{1}{4}$ ist, folgt

$$x\,(T = T_K,\ T_K) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad . \tag{28}$$

Sind T und T_K (bzw. J) vorgegeben, so ist $x = x\,(T,\ T_K)$ dadurch eindeutig bestimmt, daß beide Konsistenz-Gleichungen (27) das gleiche Θ ergeben müssen. Dabei ist vorausgesetzt, daß λ als Funktion von T und T_K bekannt ist; das nächste Kapitel zeigt, wie es in selbstkonsistenter Weise bestimmt werden kann.

5\. SELBSTKONSISTENTE BESTIMMUNG DER ENERGIEABSENKUNG

Für die Ableitung der freien Energie F nach der Wechselwirkungskonstanten gilt[12)]

$$\frac{\partial F}{\partial(\mathcal{J}/N)} = \frac{\overline{H}_{int}}{\mathcal{J}/N} \quad .$$

Dabei ist $\overline{H}_{int}$ der physikalische Erwartungswert des Wechselwirkungsoperators; nach (5) kann man zur Spur über alle Zustände übergehen, wenn man gleichzeitig durch den Normierungsfaktor Q dividiert:

$$\frac{\partial F}{\partial(\mathcal{J}/N)} = -\frac{1}{Q} \sum_{rr'} \langle \psi^{+}_{r\alpha}(\tau)\, a^{+}_{\beta}(\tau)\, a_{\beta'}(\tau)\, \psi_{r'\alpha'}(\tau) \rangle\, \sigma^{i}_{\alpha\alpha'}\, S^{i}_{\beta\beta'} \; .$$

Die Faktorisierung

$$\langle \psi^{+}_{\alpha} a^{+}_{\beta} a_{\beta'} \psi_{\alpha'} \rangle \simeq \langle \psi^{+}_{\alpha} a^{+}_{\beta} \rangle \langle a_{\beta'} \psi_{\alpha'} \rangle - \langle \psi^{+}_{\alpha} a_{\beta'} \rangle \langle a^{+}_{\beta} \psi_{\alpha'} \rangle$$

berücksichtigt wieder nur die Terme, die der Erzeugung und Vernichtung von Bindungszuständen entsprechen. Mit den Definitionen (9) hat man

$$\frac{\partial F}{\partial(\mathcal{J}/N)} = \frac{1}{Q} \left[F^{(2)}_{\alpha\beta}(\tau,\tau)\, F^{(1)}_{\alpha'\beta'}(\tau,\tau)\, \sigma^{i}_{\alpha\alpha'}\, S^{i}_{\beta\beta'} - F^{(4)}_{\alpha\beta}(\tau,\tau)\, F^{(3)}_{\alpha'\beta'}(\tau,\tau)\, \sigma^{i}_{\alpha\alpha'}\, S^{i}_{\beta'\beta} \right]$$

und mit (10)

$$\frac{\partial F}{\partial|\mathcal{J}/N|} = \frac{1}{Q} \cdot \frac{1}{|\mathcal{J}/N|} \left[\Delta^{(1)}_{\alpha\beta}\, T \sum_{\omega} F^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega) - \Delta^{(3)}_{\alpha\beta}\, T \sum_{\omega} F^{(4)}_{\alpha\beta}(\omega) \right] ,$$

wobei bereits zu den Absolutwerten der (negativen) Kopplungskonstanten übergegangen worden ist. Mit den Ausdrücken für $F^{(2)}$ und $F^{(4)}$ aus (16) und (A 2) im Anhang A führt eine längere

Rechnung auf

$$\frac{\partial F}{\partial |3/N|} = \frac{1}{Q}\cdot\frac{1}{|3|/N}\left\{(\Delta_0^2+\Delta_1^2)T\sum_\omega \frac{1}{i\omega-\lambda}(H_1(\omega)+E_2(\omega)) - \Delta_0^2 T\sum_\omega \frac{1}{i\omega-\lambda}(H_2(\omega)+E_1(\omega))\right\}$$

und unter Berücksichtigung von (A4) schließlich:

$$\frac{\partial F}{\partial |3/N|} = \frac{1}{Q}\cdot\frac{1}{(|3|/N)^2}\left[\,2\Delta_0^2\, I_2 + \Delta_1^2\,(I_1+I_2)\right].$$

Drückt man die rechte Seite durch das im vorigen Abschnitt eingeführte Verhältnis x der beiden Amplituden und durch Θ $(= 2\pi\alpha\,\Delta_1^2)$ aus, so ergibt sich

$$\frac{\partial F}{\partial(|3|/N)} = \frac{1}{\pi\alpha}\cdot\frac{x^2+2\sqrt{2}\,x}{Q\cdot(|3|/N)^2}\cdot\Theta\,.$$

Die Integration nach der Kopplungskonstanten liefert

$$\boxed{F - F_0 = \frac{1}{\pi\alpha}\int_0^{|3|/N} d(|3|/N)\,\frac{x^2+2\sqrt{2}\,x}{Q\cdot(|3|/N)^2}\cdot\Theta\,,} \tag{29}$$

wobei F_0 die freie Energie der nicht wechselwirkenden Teilchen ist. Die (innere) Energie $E = \overline{H}$ erhält man dann aus der Beziehung

$$E = F - T\cdot\frac{\partial F}{\partial T}\,,$$

bzw. die Energieabsenkung

$$E - E_0 = F - F_0 - T\frac{\partial}{\partial T}(F - F_0).$$

Dieser Energieunterschied ist bis aufs Vorzeichen mit dem durch (14) definierten λ identisch, das aus den anomalen Greensfunktionen gezogen worden ist, d.h.:

$$\boxed{\lambda = -(\mathcal{F}-\mathcal{F}_0) + T\cdot\frac{\partial}{\partial T}(\mathcal{F}-\mathcal{F}_0)\,.} \tag{30}$$

Besonders einfach werden diese Gleichungen am absoluten Nullpunkt, da hier freie und innere Energie übereinstimmen. So tritt an Stelle von (29) und (30) die Integralgleichung

$$\lambda = -\frac{1}{\pi\alpha}\int_0^{|3|/N} d(|3|/N)\,\frac{x^2+2\sqrt{2}\,x}{Q\cdot(|3|/N)^2}\,\Theta\,. \tag{31}$$

Der in (29) bzw. (31) auftretende Normierungsfaktor Q bleibt noch zu bestimmen. Zu diesem Zweck ist der durch (6) und (7) gegebene Zusammenhang

$$Q = \frac{3}{2}\,\langle a^+_\beta(\tau)\,a_\beta(\tau)\rangle - \frac{1}{2}\,\langle a^+_\beta(\tau)\,a_\beta(\tau)\,a^+_{\beta'}(\tau)\,a_{\beta'}(\tau)\rangle$$

geeignet. Bei der Faktorisierung der Zweiteilchen-Greensfunktion (der Pseudo-Fermionen) werden auch hier wieder nur Terme mit Bindungszustand-Charakter berücksichtigt, so daß unter Verwendung der in (12) definierten Greensfunktionen g, ϑ^+ und ϑ

$$\left.\begin{aligned} Q = {}& \frac{3}{2}T\sum_\omega e^{i\omega\epsilon}g_{\beta\beta}(\omega) - \frac{1}{2}\Big[T\sum_\omega e^{i\omega\epsilon}g_{\beta\beta}(\omega)\Big]^2 + \frac{1}{2}T\sum_{\omega_1}e^{i\omega_1\epsilon}g_{\beta'\beta}(\omega_1)\cdot \\ & \cdot T\sum_{\omega_2}e^{-i\omega_2\epsilon}g_{\beta\beta'}(\omega_2) - \frac{1}{2}T\sum_{\omega_1}\vartheta^+_{\beta\beta'}(\omega_1)\cdot T\sum_{\omega_2}\vartheta_{\beta\beta'}(\omega_2) \\ & [\,\epsilon \to +0\,] \end{aligned}\right\} \tag{32}$$

folgt. Die Pseudofermionen-Greensfunktion $\mathcal{G}(\omega)$ kann man aus ihrer Bewegungsgleichung

$$(i\omega - \lambda)\, \mathcal{G}_{\beta\beta'}(\omega + i\lambda) = \delta_{\beta\beta'} + \Delta^{(1)}_{\alpha\beta} F^{(2)}_{\alpha\beta'}(\omega) - \Delta^{(4)}_{\alpha\beta} F^{(3)}_{\alpha\beta'}(\omega) \tag{33}$$

gewinnen, sobald man neben der in (16) bereits gegebenen $F^{(2)}$-Funktion auch die $F^{(3)}$ - Funktion kennt. Dazu geht man zunächst mit

$$\left.\begin{aligned} F^{(1)}_{a\beta}(\omega) &= \frac{1}{i\omega + \lambda}\left[- \Delta^{(1)}_{a'\beta}\, G_{aa'}(\omega) + \Delta^{(4)}_{a'\beta}\, D_{aa'}(\omega)\right] \\ F^{(3)}_{a\beta}(\omega) &= \frac{1}{i\omega - \lambda}\left[+ \Delta^{(3)}_{a'\beta}\, G_{aa'}(\omega) - \Delta^{(2)}_{a'\beta}\, D_{aa'}(\omega)\right] \end{aligned}\right\} \tag{34}$$

in die Bewegungsgleichung von $D(\omega)$

$$D_{aa'}(\omega) = -i\pi\alpha\, \mathrm{sgn}\,\omega\, \Delta^{(1)}_{a'\beta} F^{(3)}_{a\beta}(\omega) + i\pi\alpha\, \mathrm{sgn}\,\omega\, \Delta^{(3)}_{a'\beta} F^{(1)}_{a\beta}(\omega)$$

ein, so daß

$$D_{aa'}(\omega) = \alpha\, D_{aa_1}(\omega)\, \mathcal{U}^{(1)}_{a_1a'}(-\omega) + \alpha\, G_{aa_1}(\omega)\, \mathcal{U}^{(2)}_{a_1a'}(\omega) .$$

Zusammen mit der im Anhang A bestimmten Elektronen-Greensfunktion G erhält man dann

$$D(\omega) = -E_1(\omega)\,\sigma^z + E_2(\omega)\, i\sigma^y .$$

Jetzt ist man in der Lage $F^{(3)}$ und damit auch die $\mathcal{G}_{\beta\beta'}$- Funktion (33) zu berechnen

$$g_{11}(\omega) = g_{-1-1}(\omega) \qquad = \frac{1}{i\omega}\left[1 + \frac{2\Delta_1^2}{i\omega}\left(H_1(\omega - i\lambda) + E_2(\omega - i\lambda)\right)\right]$$

$$g_{00}(\omega) \qquad = \frac{1}{i\omega}\left[1 + \frac{4\Delta_0^2}{i\omega}\left(H_1(\omega-i\lambda) + E_2(\omega-i\lambda) - H_2(\omega-i\lambda) - E_1(\omega-i\lambda)\right)\right]$$

$$g_{10}(\omega) = g_{01}(\omega) = g_{-10}(\omega) = g_{0-1}(\omega) = \frac{1}{i\omega}\cdot\frac{2\Delta_0\Delta_1}{i\omega}\left(H_1(\omega-i\lambda) + E_2(\omega-i\lambda) - H_2(\omega-i\lambda) - E_1(\omega-i\lambda)\right)$$

$$g_{1-1}(\omega) = g_{-11}(\omega) \qquad = -\frac{1}{i\omega}\cdot\frac{2\Delta_0^2}{i\omega}\left(H_2(\omega-i\lambda) + E_1(\omega-i\lambda)\right) \quad .$$

Um nach dem Einsetzen in (32) die Relation[12]

$$T\sum_\omega e^{i\omega\epsilon} A(\omega) = 2T\sum_{\omega>0} \operatorname{Re} A(\omega) + \frac{1}{2}\operatorname{sgn}\epsilon \,,$$

$$\text{falls } A(\omega) \sim \frac{1}{i\omega} \text{ für } \omega \to \infty \qquad (\epsilon \to +0)$$

ausnutzen zu können, müssen zuvor die Matrixelemente von g in die Form

$$g_{11} = \frac{\Delta_0^2}{2\Delta_0^2 + \Delta_1^2}\cdot\frac{1}{i\omega} + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{i\omega + 2a\Delta_1^2} + \frac{\Delta_1^2}{2(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)}\cdot\frac{1}{i\omega + 2a(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)}$$

$$g_{00} = \frac{\Delta_1^2}{2\Delta_0^2 + \Delta_1^2}\cdot\frac{1}{i\omega} + \frac{2\Delta_0^2}{2\Delta_0^2 + \Delta_1^2}\cdot\frac{1}{i\omega + 2a(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)}$$

$$g_{10} = -\frac{\Delta_0\cdot\Delta_1}{2\Delta_0^2 + \Delta_1^2}\cdot\frac{1}{i\omega} + \frac{\Delta_0\cdot\Delta_1}{2\Delta_0^2 + \Delta_1^2}\cdot\frac{1}{i\omega + 2a(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)}$$

$$g_{1-1} = \frac{\Delta_0^2}{2\Delta_0^2 + \Delta_1^2}\cdot\frac{1}{i\omega} - \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{i\omega + 2a\Delta_1^2} + \frac{\Delta_1^2}{2(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)}\cdot\frac{1}{i\omega + 2a(2\Delta_0^2 + \Delta_1^2)}$$

(die einzelnen Terme rechts besitzen alle die geforderte Eigenschaft für $\omega \to \infty$)

gebracht werden. So erhält man endlich

$$T\sum_\omega g_{11}(\omega)\, e^{i\omega\epsilon} = T\sum_\omega g_{00}\, e^{i\omega\epsilon} = \frac{1}{2}$$

$$T\sum_{\omega} \mathcal{G}_{10}(\omega)\, e^{i\omega\epsilon} = T\sum \mathcal{G}_{1-1}(\omega)\, e^{i\omega\epsilon} = 0$$

und damit das überraschend einfache (von λ unabhängige) Ergebnis

$$\boxed{Q = \frac{3}{4}\ .} \tag{35}$$

Dabei ist bereits verwendet worden, daß die Funktionen ϑ und ϑ^+ identisch verschwinden. Das sieht man sofort ein, wenn man die $F^{(2)}$- und $F^{(4)}$- Funktion aus (16) sowie die $F^{(1)}$- und $F^{(3)}$-Funktion aus (34) in

$$(i\omega-\lambda)\,\vartheta_{\beta\beta'}(\omega+i\lambda) = \Delta^{(1)}_{\alpha\beta}\, F^{(4)}_{\alpha\beta'}(\omega) - \Delta^{(4)}_{\alpha\beta}\, F^{(2)}_{\alpha\beta'}(\omega)$$

$$(i\omega+\lambda)\,\vartheta^+_{\beta\beta'}(\omega-i\lambda) = -\Delta^{(2)}_{\alpha\beta}\, F^{(3)}_{\alpha\beta'}(\omega) + \Delta^{(3)}_{\alpha\beta}\, F^{(2)}_{\alpha\beta'}(\omega)$$

einsetzt.

Die Berechnung der Energieabsenkung kann jetzt in selbstkonsistenter Weise erfolgen. Ausgehend von einem Anfangs-$\lambda(T,T_K)$ bestimmt man mit (27) $\Theta(T,T_K)$ und $x(T,T_K)$. Damit läßt sich das Integral (29), d.h. der Zuwachs ΔF der freien Energie berechnen. (30) gibt an, wie man daraus ein neues λ bekommt. Mit diesem verbesserten λ wiederholt man das Verfahren so lange, bis sich neues und altes λ nicht mehr unterscheiden.

In zwei Grenzfällen kann auf analytischem Wege die Lösung gefunden werden, was im nächsten Abschnitt geschehen soll.

6. EXPLIZIT LÖSBARE GRENZFÄLLE

(a) Verhalten bei T = 0

Geht man davon aus, daß sowohl Θ wie λ für $T \to 0$ einen endlichen Wert annehmen (diese Annahme wird sich als konsistent erweisen), so lassen sich die Gleichungen (27) unter Verwendung der Relation

$$\lim_{w \to \infty} [\, \psi(z+w) - \ln w \,] = 0$$

erheblich vereinfachen, - eine Auflösung nach Θ ist möglich:

$$\Theta_1 = [\, \epsilon_F^2 \cdot e^{4 I_1(x)/(\alpha|J|/N)} - \lambda^2 \,]^{\frac{1}{2}}$$

$$\Theta_2 = [\, \epsilon_F^2 \cdot e^{4 I_2(x)/(\alpha|J|/N)} - \lambda^2 \,]^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{1 + 2x^2} .$$

Schreibt man $x = x(T=0, T_K)$ unter Berücksichtigung der Eigenschaft (28) als Potenzreihe

$$x = -\frac{1}{\sqrt{2}} [\, 1 - a_1 (\alpha|J|/N) - a_2 (\alpha|J|/N)^2 \,],$$

und macht für λ den Ansatz

$$\lambda = \frac{\pi}{2\gamma} T_K \cdot [\, b_1 + b_2 \cdot (\alpha|J|/N) \,],$$

so ergeben sich für die Θ_i bei Abspaltung des nicht entwickelbaren Exponentialfaktors $\exp(-1/(2\alpha|J|/N))$ die Potenzreihen:

$$\Theta_i = \frac{\pi}{2\gamma} \cdot T_K \left[A_i + B_i \cdot (\alpha |J|/N) \right] \quad (i = 1,2),$$

wobei die A_i und B_i wie folgt mit a_1, a_2, b_1, und b_2 zusammenhängen:

$$A_1 = \left[e^{4a_1} - b_1^2 \right]^{\frac{1}{2}} \qquad B_1 = \left[(2a_2 + a_1^2) e^{4a_1} - b_1 b_2 \right] / \sqrt{A_1}$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \left[e^{-2a_1} - b_1^2 \right]^{\frac{1}{2}} \qquad B_2 = -\frac{1}{4} \left[(a_1^2 - a_1 + a_2) e^{-2a_1} + a_1 b_1^2 + b_1 b_2 \right] / \sqrt{A_2}\,.$$

Setzt man das so gewonnene Θ in (31) unter Verwendung von $Q = 3/4$ (siehe (35)) ein, so erhält man

$$\lambda = \frac{2}{3\pi} \alpha \int_0^{|J|/N} d(|J|/N) \left(3A \frac{1}{\alpha (|J|/N)^2} + (3B - 2a_1 A) \frac{1}{\alpha (|J|/N)} \right) \frac{\pi}{2\gamma} T_K\,.$$

Mit Hilfe der in (B1) und (B2) von Anhang B berechneten Integrale bekommt man

$$\lambda = \frac{4}{\pi} A \frac{\pi}{2\gamma} T_K + \frac{4}{3\pi} (3B - 2a_1 A)(\alpha |J|/N) \frac{\pi}{2\gamma} T_K\,;$$

dieses Ergebnis zeigt die gleiche J-Abhängigkeit wie obiger Ansatz für λ, der damit gerechtfertigt ist. Der Vergleich der Koeffizienten der Potenzreihe von Θ_1 mit der von Θ_2

$$A_1 = A_2 \;(= A)\,, \quad B_1 = B_2 \;(= B)$$

und die Selbstkonsistenzforderung für λ

$$b_1 = \frac{4}{\pi} A\,, \quad b_2 = \frac{4}{3\pi} (3B - 2a_1 A)$$

bestimmen a_1, a_2, b_1 und b_2 eindeutig. Damit ergibt sich für die "Amplitude" Θ das Ergebnis

$$\Theta(T=0, |J|/N) = \frac{\pi}{2\gamma} T_K \left[0.48 - 0.05 (\alpha |J|/N) \right],$$

und für die Energieabsenkung am absoluten Nullpunkt

$$E - E_0 = -\lambda = -\frac{\pi}{2\gamma} T_K \left[0.61 - 0.01 (\alpha |\mathfrak{Z}|/N) \right].$$

Das ist eine gute Übereinstimmung mit dem Ergebnis von Müller-Hartmann und Zittartz[23] (zum Vergleich müssen bei ihnen die Born-Terme weggelassen werden). Für den leicht zu bildenden Grenzwert

$$\lim_{|\mathfrak{Z}|/N \to 0} \frac{E - E_0}{(\pi/2\gamma)\, T_K} = -0.61$$

erhalten demgegenüber Abrikosov[17] $-8/3\pi$ und Nagaoka[9] $-2/\pi$. Die Grundzustandsenergie des Systems aus Leitungselektronen und lokalisierten Moment bei Wirkung einer Austausch-Kopplung liegt somit in der Größenordnung T_K unter der des Systems ohne Kopplung.

(b) Verhalten bei $T_K - T \ll T_K$

Ist bekannt, wie sich die thermodynamischen Zustandsfunktionen (wie Energie, Entropie u.s.w.) in der Umgebung von T_K verhalten, so sind definite Aussagen über die Art des hier stattfindenden Übergangs möglich.
Zu diesem Zweck entwickelt man wieder x, und zwar in diesem Fall um $T=T_K$ nach Potenzen von $(T - T_K)/T$ (mit Berücksichtigung von (28))

$$x = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 - a_1 \frac{T - T_K}{T} - a_2 \frac{(T - T_K)^2}{T^2} \right].$$

Da für $T \to T_K$ angenommen werden kann, daß

$$\frac{\Theta}{2\pi T} \ll 1 \quad \text{und} \quad \frac{\lambda}{2\pi T} \ll 1 \, ,$$

lassen sich die Ψ-Funktionen in (27) nach kleinen Argumenten entwickeln. Mit dem Ansatz

$$\lambda = b_1 \cdot (T - T_K) + b_2 \, (T - T_K)^2 / T_K$$

erhält man so für Θ

$$\Theta_i = A_i \cdot (T - T_K) + B_i \cdot (T - T_K)^2 / T_K \qquad (i = 1,2) \, .$$

Nach (29) läßt sich jetzt der Zuwachs der freien Energie

$$\Delta F = -\frac{2}{\pi\alpha} A \int_{(|J_T|/N)}^{(|J_{T_K}|/N)} \frac{d(|J|/N)}{(|J|/N)^2} \cdot (T - T_K) - \frac{2}{3\pi\alpha} (3B - 2a_1 A) \int \frac{d(|J|/N)}{(|J|/N)^2} \cdot \frac{(T - T_K)^2}{T_K}$$

berechnen; als untere Integrationsgrenze ist $(|J_T|/N) = \left[2\alpha \ln \frac{2\gamma\varepsilon_F}{\pi T}\right]^{-1}$ zu nehmen, da $\Theta(T, T_K)$ für $T_K \leq T$ verschwindet. Im Anhang B II werden die Integrale behandelt, womit man

$$\Delta F = \frac{2}{\pi} A \cdot \frac{(T - T_K)^2}{T_K} + \frac{2}{3\pi} \left(-A + 2B - \frac{4}{3} a_1 A\right) \cdot \frac{(T - T_K)^3}{T_K^2}$$

erhält. Anschließende Differentiation nach T liefert mit (30):

$$\lambda = + \frac{4}{\pi} A \cdot (T - T_K) + \frac{4}{\pi} \left(B - \frac{2}{3} a_1 A\right) \cdot \frac{(T - T_K)^2}{T_K} \; ;$$

das ist die gleiche Struktur, wie sie weiter oben der Ansatz für λ besitzt.

Die Bedingung $\Theta_1 = \Theta_2$ zusammen mit der Selbstkonsistenzforderung für λ ermöglichen die Berechnung aller Koeffizienten, so daß man für das Verhalten der verschiedenen Größen in der Nähe von T_K erhält:

$$\Theta = -0.76\,(T-T_K) - 0.27\,(T-T_K)^2/T_K$$
$$E-E_0 = -\lambda = 0.97\,(T-T_K) + 0.3\,(T-T_K)^2/T_K$$
$$F-F_0 = -0.48\,(T-T_K)^2/T_K + 0.06\,(T-T_K)^3/T_K^2.$$

Dieses Ergebnis zeigt das für einen Phasenübergang 2.Art typische Verhalten: Der Ordnungsparameter Δ $(\sim\sqrt{\Theta})$ geht bei $T = T_K$ stetig mit unendlicher Steigung gegen Null, die zusätzliche freie Energie ΔF verschwindet an derselben Stelle stetig mit waagrechter Tangente. Aus der freien Energie läßt sich leicht der Zuwachs in der spezifischen Wärme (pro magnetische Verunreinigung) errechnen:

$$\Delta c = 0.97 + 0.66\,(T-T_K)/T_K\ .$$

D.h. bei der Übergangstemperatur T_K hat die spezifische Wärme den zu erwartenden (weil Phasenübergang 2. Art) Sprung.

Anhang A

Mit der Wahl (22) der Amplituden bekommt (19) die Gestalt

$$\mathcal{U}^{(1)}(\omega,\lambda) = b\sigma^{0} + \varsigma\sigma^{x}$$

$$\mathcal{U}^{(2)}(\omega,\lambda) = -d\sigma^{z} + g\, i\sigma^{y}$$

(σ^0, σ^x, σ^y und σ^z sind die üblichen Pauli-Matritzen), wobei

$$b = (\Delta_0^2 + \Delta_1^2)\cdot\left[\frac{1}{i\omega+\lambda} + \frac{1}{i\omega-\lambda}\right], \quad \varsigma = \Delta_0^2\cdot\left[\frac{1}{i\omega+\lambda} - \frac{1}{i\omega-\lambda}\right]$$

$$d = \Delta_0^2\cdot\left[\frac{1}{i\omega+\lambda} + \frac{1}{i\omega-\lambda}\right], \quad g = (\Delta_0^2+\Delta_1^2)\cdot\left[\frac{1}{i\omega+\lambda} - \frac{1}{i\omega-\lambda}\right].$$

Damit kann man (20) in der Form

$$\left.\begin{aligned} [1 + a\,\mathcal{U}^{(1)}(\omega,\lambda)]\cdot G(\omega) + a\,\mathcal{U}^{(2)}(\omega,\lambda)\cdot D^{+}(\omega) &= -a \\ -a\,\mathcal{U}^{(2)}(-\omega,\lambda)\cdot G(\omega) + [1 - a\,\mathcal{U}^{(1)}(-\omega,\lambda)]\cdot D^{+}(\omega) &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{(A1)}$$

schreiben. Dieses in den Spinkomponenten von G und D^+ lineare inhomogene Gleichungssystem hat die Lösung

$$\left.\begin{aligned} G(\omega) &= H_1(\omega)\,\sigma^{0} + H_2(\omega)\,\sigma^{x} \\ D^{+}(\omega) &= E_1(\omega)\,\sigma^{z} + E_2(\omega)\, i\sigma^{y}, \end{aligned}\right\} \quad \text{(A2)}$$

mit

$$\left.\begin{aligned} H_1 &= -a\frac{A\cdot C}{A^2-B^2}, \quad H_2 = a\,\frac{B\cdot C}{A^2-B^2} \\ E_1 &= \frac{a^2}{A^2-B^2}\left[(1+ab)(gB-dA) - a\varsigma\,(dB-gA)\right] \\ E_2 &= \frac{a^2}{A^2-B^2}\left[(1+ab)(dB-gA) - a\varsigma\,(gB-dA)\right] \\ A &= (1+ab)\cdot C - a^2 d\left[d(1+ab) - ga\varsigma\right] - a^2 g\left[g(1+ab) - da\varsigma\right] \\ B &= a\varsigma\cdot C - a^2 d\left[g(1+ab) - da\varsigma\right] - a^2 g\left[d(1+ab) - da\varsigma\right] \\ C &= (1+ab)^2 - a^2\varsigma^2 \end{aligned}\right\} \quad \text{(A2')}$$

Man erkennt sogleich, daß H_1 und E_1 ungerade, H_2 und E_2 gerade Funktionen von ω sind. In den Rechnungen werden die H_i und E_i in den beiden Kombinationen H_2+E_1 und H_1+E_2 benötigt; diese Ausdrücke sind vergleichsweise einfach:

$$\left.\begin{aligned} H_2 + E_1 &= (i\omega-\lambda)\cdot\frac{-2a^2\Delta_0^2}{[i\omega-\lambda+2a\Delta_1^2]\cdot[i\omega-\lambda+2a(2\Delta_0^2+\Delta_1^2)]} \\ H_1 + E_2 &= (i\omega-\lambda)\cdot\frac{-a[i\omega-\lambda+2a(\Delta_0^2+\Delta_1^2)]}{[i\omega-\lambda+2a\Delta_1^2]\cdot[i\omega-\lambda+2a(2\Delta_0^2+\Delta_1^2)]}\,. \end{aligned}\right\} \quad (A3)$$

Die wiederholt auftretenden Summen

$$I_{H_i+E_k} = \frac{J}{N}\,T\sum_{\omega}\frac{1}{i\omega-\lambda}\,\big(H_i(\omega) + E_k(\omega)\big)$$

können mit Hilfe von Partialbruchzerlegung in die folgende Darstellung gebracht werden:

$$\left.\begin{aligned} I_{H_2+E_1} &= -I_1 + I_2 \\ I_{H_1+E_2} &= -I_1 - I_2\,, \end{aligned}\right\} \quad (A4)$$

wobei

$$I_1 = \frac{1}{2}\cdot\frac{J}{N}\,T\sum_{\omega}\frac{a}{i\omega-\lambda+2a\Delta_1^2} = \pi\alpha\frac{J}{N}\,T\sum_{\omega>0}\frac{\omega+2\pi\alpha\Delta_1^2}{(\omega+2\pi\alpha\Delta_1^2)^2+\lambda^2}$$

$$I_2 = \frac{1}{2}\,\frac{J}{N}\,T\sum_{\omega}\frac{a}{i\omega-\lambda+2a(2\Delta_0^2+\Delta_1^2)} = \pi\alpha\frac{J}{N}\,T\sum_{\omega>0}\frac{\omega+2\pi\alpha(2\Delta_0^2+\Delta_1^2)}{[\omega+2\pi\alpha(2\Delta_0^2+\Delta_1^2)]^2+\lambda^2}\,.$$

Anhang B

Der Kürze wegen wird im folgenden für $(|J|/N)$ stets J geschrieben.

I) Hier soll gezeigt werden, wie die in Kapitel 6.(a) auftretenden Integrale

$$\int_0^J dJ\, J^n T_K \qquad \text{(ganzes n)}, \quad T_K = \frac{2\gamma\epsilon_F}{\pi}\, e^{-1/2\alpha J}$$

in sukzessiver Weise berechnet, d.h. in eine Potenzreihe entwickelt werden können. Partielle Integration liefert die Iterationsformel

$$\int_0^J dJ\, J^n T_K = 2\alpha J^{n+2} T_K - 2(n+2)\alpha \int_0^J dJ\, J^{n+1} T_K ,$$

insbesondere

$$\int_0^J dJ\, J^{-2} T_K = 2\alpha T_K \qquad \text{(B1)}$$

$$\int_0^J dJ\, J^{-1} T_K = 2\alpha J\, T_K - 4\alpha^2 J^2 T_K + 8\alpha^2 \int_0^J dJ\, J\, T_K .$$

Mit der Abschätzung

$$\left| \int_0^J dJ\, J\, T_K \right| \leq \frac{1}{2} J^2 T_K$$

hat man für letztere Gleibhung

$$\int_0^J dJ\, J^{-1} T_K = \left[2\alpha J + O(J^2) \right] \cdot T_K \qquad \text{(B2)}$$

II) In Kapitel 6.(b) sind die Integrale

$$L_1 = \int_{J_T}^{J} \frac{dJ}{J^2} (T - T_K) \quad \text{und} \quad L_2 = \int_{J_T}^{J} \frac{dJ}{J^2} (T - T_K)^2 / T_K$$

(wobei $J_T = \left[2\alpha \ln(2\gamma\epsilon_F/\pi T)\right]^{-1}$)

nach Pötenzen von $(T-T_k)$ zu entwickeln. Die Substitution $y=J^{-1}$ liefert zunächst

$$L_1 = -\int_{J_T^{-1}}^{J^{-1}} dy\,(T-T_K) \qquad L_2 = -\int_{J_T^{-1}}^{J^{-1}} dy \cdot \frac{(T-T_K)^2}{T_K} \;;$$

macht man anschließend die Substitution $x=T-T_K(y)$, dann lassen sich die so erhaltenen Integrale

$$L_1 = -2\alpha \int_0^{T-T_K} dx\, \frac{x}{T-x} \qquad \text{u.}\quad L_2 = -2\alpha \int_0^{T-T_K} dx\, \frac{x^2}{(T-x)^2}$$

leicht berechnen:

$$L_1 = -2\alpha \left[-(T-T_K) + T \cdot \ln(T/T_K) \right]$$

$$L_2 = -2\alpha \left[(T-T_K) + T^2/T_K - T - 2T \cdot \ln(T/T_K) \right].$$

Wegen

$$\ln(T/T_K) = \frac{T-T_K}{T_K} - \frac{1}{2} \cdot \frac{(T-T_K)^2}{T_K^2} + \frac{1}{3} \cdot \frac{(T-T_K)^3}{T_K^3} + \cdots$$

bekommt man schließlich:

$$\left.\begin{aligned} L_1 &= -\alpha \frac{(T-T_K)^2}{T_K} + \frac{1}{3} \cdot \alpha \cdot \frac{(T-T_K)^3}{T_K^2} + o\left((T-T_K)^4\right) \\ L_2 &= -\frac{2}{3}\alpha \frac{(T-T_K)^2}{T_K^2} + o\left((T-T_K)^4\right) \end{aligned}\right\} \qquad \text{(B3)}$$

LITERATURVERZEICHNIS

1. Daybell, M.D. and Steyert, W.A., Rev. Mod. Phys. 40,380,(1968)
2. Daybell, M.D. and Steyert, W.A., Journal of Appl. Physics 40,1056(1969)
3. Friedel, J., Can. J. Phys. 34,1190(1956)
   Nuovo Cimento Suppl. 7,287(1958)
4. Anderson, P.W., Phys. Rev. 124,41(1961)
5. Kondo, J., Progr. Theor. Phys. 32,37(1964)
6. Abrikosov, A.A., Physics 2,5(1965)
7. Abrikosov, A.A., Physics 2,61(1965)
8. Suhl, H., "Rendiconti della Scuola Internazionale di Fisica Enrico Fermi" 1966, Ac. Press, London 1967
9. Nagaoka, Y., Progr. Theor. Phys. 37,13(1967)
10. Zittartz, J. and Müller-Hartmann, E., Z. f. Physik 212, 380(1968)
11. Nagaoka, y., Phys. Rev. 138, A1112(1965)
12. Abrikosov, A.A., Gorkov, L.P. and Dzyaloshinski, i.e., Methods of Quantum Field Theory in Statistical Mechanics (New York, 1963)
13. Brenig, W. and Götze, W., Z. f. Physik 217,188(1968)
14. Zittartz, J., Z. f. Physik 217,43(1968)
15. Kawamura, K., Progr. Theor. Phys. 42,1058(1969)
16. Takano, F. and Ogawa, T., Progr. Theor. Phys. 35,343(1966)
17. Abrikosov, A.A., sov. Phys. JETP 26,1192(1968)
18. Abrikosov, A.A., Sov. Phys. JETP 26,641(1968)
19. Nakajima, S., Progr. Theor. Phys. 40,919(1968)
20. Doniach, S., Phys. Rev. 144,382(1966)

21. Wang, Y.L., Shtrikman, S. and Callen, H., Phys. Rev. 148, 419(1966)

22. Wang, Y.L. and Callen, H., Phys. Rev. 148, 433(1966)

23. Müller-Hartmann, E. and Zittartz, J., Z. f. Physik 225, 455(1969)

Herrn Professor Dr. P. Fulde möchte ich für sein förderndes Interesse an dieser Arbeit und für kritische Diskussionen danken.

Besonders bin ich Herrn Dr. J. Keller für viele fruchtbare Anregungen und klärende Gespräche zu Dank verpflichtet.

Weiter danke ich Herrn Dr. Everts und Herrn Dipl. Phys. H. Blask für zahlreiche Diskussionen.

LEBENSLAUF

Am 2.12.1942 wurde ich, Dankwart Zimmerling, in Vatterode bei Mansfeld geboren. Ich besuchte die Volksschule (Einschulung am 27. 4. 49) in Asbach im Kreis Hersfeld und vom Frühjahr 1953 bis Herbst 1954 den Mittelschulzug in Niederaula, anschließend die Mittelschule in Altengronau (Schlüchtern). Ostern 1956 wurde ich Schüler des Aufbaugymnasiums der Ulrich von Hutten-Schule in Schlüchtern, in der ich am 1. 3. 1962 die Reifeprüfung ablegte.

Im Mai 1962 nahm ich an der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt am Main das Studium der Physik auf. Hier bestand ich am 28.7.64 die Vordiplomprüfung. Unter Anleitung von Herrn Professor Dr. G. Süßmann schrieb ich meine Diplomarbeit im Institut für Theoretische Physik. Im Frühjahr 1967 legte ich die Diplomprüfung ab. Seit dieser Zeit arbeite ich als Mitarbeiter von Herrn Professor Dr. P. Fulde über magnetische Verunreinigungen in Metallen. Im Mai 1969 wurde ich Verwalter einer wissenschaftlichen Assistentenstelle.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren Drs. Baer, Benz, Bilz, Doiwa, Ebert, Franz, Fulde, Köthe, Martienssen, Mrowka, Süßmann.